


**EGEE се бори с маларията чрез грид-експеримента WISDOM**

Първото в областта на биомедицината предизвикателство за обработка на данни с цел откриване на лекарства, което беше стартирано в грид-инфраструктурата на EGEE от 11 юли до 19 август 2005 г., завърши успешно. Чрез този експеримент, озаглавен "Мъдрост" (от английски - WISDOM - *Wide In Silico Docking On Malaria*), бяха изследвани над 46 милиона свързани лиганди, което на един отделен компютър би отнело 80 години. Обикновено силициевото свързване се осъществява върху класически компютърни клъстери и завършва с намирането на около 100 000 свързани лиганди. Този тип научно предизвикателство не би било възможно без грид-инфраструктурата - бяха използвани едновременно 1000 компютри в 15 страни по света.

Приложението за откриване на лекарства, в което учените използват подхода *in silico docking*, беше започнато и реализирано от Института за алгоритми и научни пресмятания във Фраунхоф в Германия (SCAI) и Лабораторията по корпускулярна физика в Клермон-Феран във Франция (IN2P3). То беше стартирано в EGEE грид-инфраструктурата през декември 2004. Свързването *in silico* позволява на изследователите да изчислят вероятността потенциалните лекарства да се свържат с протеина-мишена и е един от най-обещаващите подходи за ускоряване на времето и намаляване на цената за откриването на нови лекарства срещу заболявания като маларията. Експериментът "Мъдрост" демонстрира как грид-пресмятането може да подпомогне процедурата по откриване на нови лекарства чрез ускоряване на целия процес. Пълният обем от генерирани данни показва потенциалните възможности на грид-пресмятането за откриване на лекарства, а също и за други приложения в биомедицината.

Успехът на този първи експеримент за обработка на биомедицински данни посредством услугите, предоставени от EGEE, е стъпка към изграждането на изцяло базирана на свързването в силиций платформа за откриване на лекарства - да се предложат нови инхибитори за мишените, засегнати при малария, като се използва техниката на свързване. Именно чрез стартираното приложение, при което се генерира голям поток от данни - милиони файлове с общ обем от няколко терабайта (един милион мегабайта се равнява на около 1500 компактдиска), стана възможно успешното тестване на грид-инфраструктурата и услугите.

Д-р Мартин Хофман, ръководител на Приложението за откриване на лекарства при Института за алгоритми и научни пресмятания във Фраунхоф, каза: "Проведеният експеримент показва, че ние сме способни да изследваме впечатляващ брой лиганди, благодарение на EGEE както и на отговорността и самоотвержеността на медицинските работници и институтите, които участваха в експеримента. Следващата стъпка сега е да анализираме това огромното количество резултати, получени от експеримента, което изиска значителни усилия".

Следващите стъпки за Приложението за откриване на лекарства включват класификация на голямото количество информация, за да се идентифицират потенциалните лекарства за третиране на редица заболявания и да се намали дистанцията между виртуалното наблюдение и реалното ниво на разработване на лекарства в света.

"Ние вече изградихме консорциум на изследователите и фармацевтичните лаборатории, придобили опит в тази област, и планираме химичен синтез и тестване на поне няколко от "виртуалните кандидати за лекарства",

получени чрез виртуално наблюдение в грид-системата. Това можеше да доведе до намиране на значителен брой реални молекули - кандидати за лекарства, които по-нататък да бъдат доразвити до истински терапевтични субстанции. Това е изключителен период в областта на откриването на лекарства", добави д-р Мартин Хофман.

Приложението за откриване на лекарства беше развито, за да увеличи възможностите на фармацевтичните компании и институтите за академично проучване да обменят разнообразна, комплексна и неклассифицирана информация за дадено заболяване с цел съвместно изследване и взаимна изгода. То също допринася и за снижаване на бариерата, която трябва да се преодолее, за да се участва в дейности, като откриване на по-евтини медикаменти и инсектициди, като по този начин да се подпомага борбата срещу заболяванията, които забавят развитието на страните от третия свят.

Проектът EGEE разви международна грид-инфраструктура, която предоставя на учените от цял свят достъп до главните компютърни ресурси по света. Досега проектът EGEE регистрира широк спектър от приложения от многобройни промишлени и академични сектори, като Физика на високите енергии, Биомедицина, Науките за Земята, Астрофизиката и Изчислителната химия. Съществуват над 20 различни работещи приложения.

Участващите партньори в експеримента "Мъдрост" са: IN2P3-LPC, CNRS, IN2P3, SCAI, проектите ACCAMBA и AUVERGRID. Следните институти предоставиха изчислителни ресурси: ASCC (Тайпе); IPP-BAS, IMBM-BAS и IPP-ISTF (България); CYFRONET (Полша); ICI (Румъния); CEA-DAPNIA, CGG, IN2P3-CC, IN2P3-LAL, IN2P3-LAPP and IN2P3-LPC (Франция); SCAI (Германия); INFN (Италия); NIKHEF, SARA и Виртуалната лаборатория за е-науката (Холандия); IMPB RAS (Русия), UCY (Кипър); AUTH FORTH-ICS и HELLASGRID (Гърция), RBI (Унгария), TAU (Израел), CESGA, CIEMAT, CNB-UAM, IFCA, INTA, PIC и UPV-GryCAP (Испания), BHAM, университетът в Бристол, IC, Университетът в Ланкастър, MANHEP, Университетът в Оксфорд, RAL и Университет в Глазгоу (Великобритания).

Бележки на редактора:

1. За повече информация за Приложението за откриване на лекарства посетете <http://public.eu-egee.org/pr/> Настоящият процес за откриване и разработване на лекарства е бавен и скъп. Само 1 от 10 000 съединения се подготвя за пазара и може да отнеме повече от 15 години и \$800 милиона, докато то стане икономически изгодно. Предизвикателствата пред Приложението за откриване на лекарства са намаляване на себестойността на разработване и времето за пускане в търговската мрежа, както и увеличаване на вероятността за успех на най-многообещаващите кандидати за нови медикаменти.
2. EGEE е финансиран от Европейската комисия. Проектът има за цел да осигури на изследователи от академичната и индустриалната общност достъп до основните компютърни ресурси, независимо от тяхното географско местоположение. За повече информация за EGEE посетете <http://public.eu-egee.org>
3. Определението за лиганд е молекула, като антитяло, хормон или субстанция, която се свързва с рецептор.
4. За повече информация за EGEE се свържете с Джоан Барнет (EGEE External Relations Officer) на телефон: +31 (0)20 530 4488 или на email: [Barnett@terena.nl](mailto:Barnett@terena.nl)
5. За повече информация за експеримента "Мъдрост" или други приложения, стартирани на EGEE грид-инфраструктурата, се свържете с Винсент Бретон (EGEE Applications Manager) на телефон +33 4 73 40 72 19 или на email: [Breton@clermont.in2p3.fr](mailto:Breton@clermont.in2p3.fr)